Modeling of Carbon Dioxide Absorption Using Hydroxyethyl Piperazine Solution: Application of Response Surface Methodology and Artificial Neural Networks

Fatemeh Bahmanzadegan [1], Ahad Ghaemi [2*]

[1] PhD student in Chemical Engineering, Iran University of Science and Technology
[2] Professor of Chemical Engineering, Iran University of Science and Technology

ABSTRACT

In this study, the modeling of carbon dioxide (CO_2) absorption in a wet wall column were conducted using response surface methodology (RSM) and artificial neural networks (ANN). The input variables included the molality of the absorbent, inlet CO_2 pressure, solvent loading (%), total system pressure, and gas flow rate, while the output variable was the outlet pressure of the wet wall column. The RSM approach was first applied to evaluate and optimize the system response, followed by prediction using two neural network architectures: Multi-Layer Perceptron (MLP) and Radial Basis Function (RBF) networks. Based on the outlet pressure, the CO_2 flux through the column could be calculated. In the MLP model, a mean squared error (MSE) of 3.2244×10^{-6} was achieved using two hidden layers with 3 and 7 neurons over 219 epochs. The R^2 value obtained from the RSM model using a quadratic function was 0.9998. For the neural networks, the R^2 values were 0.99999 and 0.99997 for the MLP (with Trainbr training function) and RBF models, respectively. The results demonstrate that both ANN and RSM approaches can effectively predict the outlet pressure of the wet wall column, offering reliable tools for modeling reactive CO_2 absorption processes.

Keywords: CO_2 Absorption; Wet Wall Column; Artificial Neural Network; Multilayer Perceptron; Radial Basis Functions.

UNCORRECTED PROOF

* Corresponding Author: Email: aghaemi@iust.ac.ir

مدل‌سازی فرآیند جذب کربن دی اکسید توسط محلول هیدروکسی اتیل پیپرازین با استفاده از روش سطح پاسخ و شبکه‌های عصبی

فاطمه بهمن زادگان [۱]، احد قائمی [۲*]

[۱] دانشجوی دکتری مهندسی شیمی، دانشگاه علم و صنعت ایران

[۲] استاد مهندسی شیمی، دانشگاه علم و صنعت ایران

UNCORRECTED PROOF

چکیده

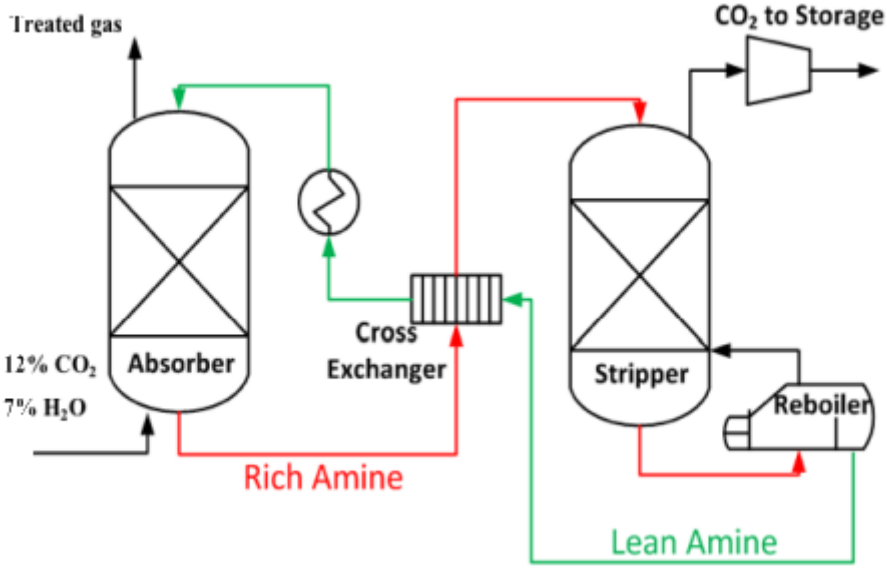
در این تحقیق به مدل‌سازی فرآیند جذب کربن دی اکسید توسط ستون دیواره مرطوب با استفاده از طراحی آزمایش(RSM) و شبکه عصبی (ANN) پراخته شد. متغیرهای ورودی شامل مولالیته حلال مورد استفاده، فشار ورودی گاز کربن دی اکسید، درصد بارگذاری حلال، فشار کل و دبی گاز و پارامتر خروجی، فشار خروجی ستون دیواره مرطوب انتخاب شد. با استفاده از روش سطح پاسخ، خروجی مدنظر ارزیابی، بهینه‌سازی و سپس از دو شبکه پرسپترون چند لایه (MLP) و توابع پایه شعاعی (RBF) برای پیش‌بینی آن استفاده شد. در شبکه MLP میزان MSE برای دو لایه پنهان با ۳ و ۷ نورون برابر با ۰/۰۰۰۰۰۳۴۲۲ در ۲۱۹ دوره به‌دست آمد. مقدار R^2 برای مدل RSM برابر با ۰/۹۹۹۸ با استفاده از مدل Quadratic به دست آمد. برای شبکه‌های MLP با تابع آموزش Trainbrو RBF نیز مقدار R^2 به ترتیب برابر با ۰/۹۹۹۹۹ و ۰/۹۹۹۹۷به دست آمد. نتایج به‌دست آمده نشان داد که شبکه‌های عصبی و مدلRSM می‌توانند به طور موثری برای تخمین فشار خروجی ستون دیواره مرطوب استفاده شوند.

کلمات کلیدی: جذب کربن دی اکسید، ستون دیواره مرطوب، شبکه عصبی مصنوعی، پرسپترون چند لایه، توابع پایه شعاعی.

* Email: aghaemi@iust.ac.ir

۱- مقدمه

انتشار بیش از حد گازهای گلخانه‌ای باعث مشکلات زیادی برای کره زمین شده که یکی از آثار آن تغییر اقلیم در سراسر جهان است. از میان گازهای گلخانه‌ای، کربن دی اکسید، اصلی‌ترین علت گرم شدن کره زمین است. میزان کربن دی اکسید در اتمسفر به دلیل فعالیت‌های انسانی و صنعتی و در درجه اول احتراق سوخت‌های فسیلی از ۲۸۰ پی پی ام در سال ۱۸۵۰ به ۴۰۰ پی پی ام در سال ۲۰۱۶ افزایش یافته است، که این روند همچنان ادامه دارد [۱, ۲]. لذا کاهش انتشار و حذف کربن دی اکسید بسیار اهمیت دارد. فرآیندهای مختلفی نظیر جذب سطحی [۳]، جذب با حلال [۴]، سرما سازی و استفاده از غشا برای حذف کربن دی اکسید استفاده می‌شوند که از بین این روش‌ها استفاده از حلال بسیار گسترش یافته است. استفاده از آمین اولین بار در سال ۱۹۳۰ برای حذف گازهای اسیدی (CO_2 و H_2S) از جریان گاز طبیعی به ثبت رسید [۱]. این فرآیند پیشرفته‌ترین فناوری برای جذب کربن دی اکسید پس از احتراق است که می‌تواند به صورت صنعتی به کار گرفته شود. شماتیک فرآیند جذب کربن دی اکسید توسط آمین برای جذب در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱. شماتیک فرآیند جذب کربن دی اکسید گاز خروجی از دودکش کارخانه‌ها توسط آمین [۱]

مطابق شکل ۱ گازهای دودکش حاصل از احتراق، از پایین وارد ستون شده و به صورت خلاف جهت با حلال آمین که از بالا وارد شده است، تماس برقرار می‌کند. ۹۰ درصد کربن دی اکسید موجود در جریان گاز توسط آمین گرفته می‌شود و گاز تصفیه شده از بالای ستون خارج می‌شود. سپس کربن دی اکسید آزاد شده از بالای دستگاه جمع‌آوری می‌شود و برای استفاده و جداسازی فشرده می‌شود، در حالی که حلال آمین بازیابی شده و برای چرخه بعدی راهی ستون جذب خواهد شد. پیپرازین

(PZ)، یک دی آمین[1] حلقوی نوع دوم، با فرمول شیمیایی باز شده‌ی $HN\text{-}(CH_2CH_2)_2\text{-}NH$، و واکنش‌پذیری بسیار بالا با CO_2 است. بخشی از واکنش‌پذیری بالای PZ، به دلیل در اختیار داشتن دو گروه آمینی نوع دوم $(-NH)$ است که منجر به ظرفیت بارگذاری CO_2 بیشتر آن (بالاتر از ۰/۵)، نسبت به آلکانول‌آمین‌های متداول نوع اول و دوم شده است [۵]. پژوهشی به بررسی جذب CO_2 با استفاده از ۳۰ درصد وزنی کربنات پتاسیم (K_2CO_3) به همراه PZ در غلظت‌های مختلف (۱، ۳ و ۵ درصد) می‌پردازد. افزودن ۵ درصد PZ به طور قابل توجهی راندمان حذف CO_2 را افزایش داده و در دمای ۵۰ درجه سانتی‌گراد و دبی جریان ۲ لیتر بر دقیقه به میزان ۹۲/۷۶ درصد می‌رساند [۶]. پژوهش دیگری به بررسی جذب CO_2 با استفاده از پیپرازین نیمه‌آبی می‌پردازد. این پژوهش نشان‌داد که افزایش نرخ جذب در بارگذاری‌های کم و متوسط است، بدون اینکه رسوب‌گذاری مشاهده شود [۷]. نتایج همچنین نشان داد که ضریب انتقال جرم محلول ۵ مولال پیپرازین ٪۳۰ بالاتر از محلول ۸ مولال پیپرازین است که علت اصلی آن ویسکوزیته کمتر آن است. همچنین نتایج آزمایش‌ها در مقیاس آزمایشگاهی نشان داد که محلول ۵ مولال پیپرازین میزان انرژی کمتری در مقایسه با محلول ۸ مولال پیپرازین مصرف می‌کند. لذا پیپرازین دارای نرخ جذب بالا، پایداری خوب، ویسکوزیته کم و ظرفیت جذب بالا است، در حالی که یک عیب کوچک یعنی حلالیت جامد در آن، کاربرد آن را محدود می‌کند. ۲-متیل پیپرازین آبی (MPZ) و ترکیب MPZ/PZ جذاب هستند زیرا بیشتر مزایای PZ را حفظ کرده و بر مشکل حلالیت آن غلبه می‌کنند.

در سال‌های اخیر استفاده از روش‌های سطح پاسخ و شبکه عصبی برای پیش‌بینی میزان جذب کربن دی اکسید با توجه به عوامل تاثیرگذار بر آن، به شدت گسترش پیدا کرده است. نوروزبهاری و همکاران حدود ۶۰۰ داده تجربی تهیه و دما، فشار جزئی کربن‌دی‌اکسید و غلظت پیپرازین را به‌عنوان ورودی شبکه‌های عصبی انتخاب کردند. شبکه منتخب این تحقیق دارای دو لایه مخفی ۸ و ۱۱ نورونی بوده است که با ضریب تعیین ۰/۹۹۷، میانگین توان دوم خطاها برابر ۰/۰۰۰۶۹۳۱ و درصد متوسط مطلق خطای نسبی ۲/۳۹۲۷ عملکرد مناسبی از خود نشان داد [۸]. گلزار و همکاران از داده‌های تجربی مربوط به جذب کربن‌دی‌اکسید در محلول‌های دوتایی و سه‌تایی آمینی و همچنین محلول‌های آمینی حاوی مایع یونی برای مدل‌سازی شبکه عصبی استفاده کردند. برای این کار دما، فشار، درصد وزنی آمین‌ها و مایعات یونی و همچنین ضریب بی‌مرکزی و وزن مولکولی مایعات یونی را به‌عنوان شاخص نوع مایع یونی برای ورودی انتخاب کردند. این دو پارامتر در محلول‌های فاقد مایع یونی صفر در نظر گرفته شدند. بهرین نتیجه برای شبکه عصبی با ضریب تعیین ۰/۹۹۱ بوده است [۹]. باغبان و همکاران از ۵۳۶۸ داده تجربی مربوط به جذب کربن‌دی‌اکسید در بیش از ۶۷ مایع یونی بریا مدل‌سازی شبکه عصبی استفاده کردند. برای این منظور سه شبکه SVM، RBF و MLP توسعه داده شد. ورودی‌های این شبکه شامل دما و فشار عملیاتی، دمای بحرانی، فشار بحرانی و ضریب بی‌مرکزی مربوط به هر مایع یونی بوده و کسر مولی کربن‌دی‌اکسید به‌عنوان خروجی این شبکه انتخاب

[1] Diamine

UNCORRECTED PROOF

شدند. سه پارامتر آخر به‌عنوان شاخص‌های هر ماده در شبکه انتخاب شده است. ضریب تعیین سه شبکه SVM، RBF و MLP به ترتیب ۰/۹۹۴۲، ۰/۹۷۸۹ و ۰/۹۷۱۵ و میانگین توان دوم خطاها برای سه شبکه به ترتیب ۰/۰۰۰۳۵، ۰/۰۰۱۲۸۸ و ۰/۰۰۱۷۴۰ حاصل شد [۱۰].

برای روشن شدن جایگاه پژوهش حاضر نسبت به مطالعات اخیر، توجه به این نکته ضروری است که کارهای اخیر تمرکز اصلی خود را بر طراحی و غربال‌گری مولکولی مشتقات پیپرازین و ارتباط ساختار بر عملکرد گذاشته‌اند [۱۱]. در مقابل، برخی دیگر مدل‌های ANN عمومی برای پیش‌بینی حلالیت بارگذاری تعادلی در سیستم‌های آمینی را توسعه داده‌اند [۱۲]. همچنین مطالعاتی وجود دارد که ادغام RSM و ANN را برای مدل‌سازی جذب CO_2 در حلال‌های آمینی گزارش کرده‌اند ([۱۳, ۱۴]). تمایز کار حاضر در این است که با تکیه بر داده‌های ستون دیواره مرطوب و انتخاب متغیرهای عملیاتی کلیدی به اثر استفاده از هیدروکسی اتیل پیپرازین(HEP) در فرآیند جذب کربن‌دی‌اکسید پرداخته است. اثر غلظت بر سرعت جذب کربن‌دی‌اکسید و هزینه بازسازی حلال نیز مورد بررسی قرار گرفته است. میزان حلالیت و جذب کربن‌دی‌اکسید در محلول‌های ۳،۵ و۷/۷ مولال هیدروکسی‌اتیل پیپرازین با استفاده از روش سطح پاسخ و شبکه‌های عصبی مصنوعی بررسی شده است؛ بنابراین برای تصمیم‌گیری عملیاتی و طراحی آزمایش‌های آتی در بازه عملکردی مشابه، مسیر سریع‌تری فراهم می‌سازد.

۲- تئوری فرآیند

در این مطالعه، برای بررسی رفتار جذب کربن دی‌اکسید، از ستون جذب با دیواره مرطوب[1] استفاده شده است. ستون دیواره مرطوب نوعی ستون آزمایشگاهی استوانه‌ای است که در آن فاز مایع (حلال جاذب) به‌صورت لایه نازکی از سطح داخلی دیواره ستون به سمت پایین جریان می‌یابد، در حالی‌که گاز حاوی CO_2 به‌صورت جریان مخالف از پایین به بالا وارد می‌شود. این سامانه امکان ایجاد تماس مؤثر بین گاز و مایع را فراهم می‌سازد، به‌ویژه زمانی که هدف مطالعه انتقال جرم یا مکانیزم واکنش جذب در شرایط کنترل‌شده و با حذف اثر اختلاط مکانیکی یا انتقال حرارت پیچیده است. استفاده از ستون دیواره مرطوب به دلیل هندسه ساده و شرایط جریان کاملاً تعریف‌شده، در مدل‌سازی سینتیکی و ترمودینامیکی فرآیندهای جذب واکنشی بسیار رایج است و اجازه می‌دهد ضرایب انتقال جرم و پارامترهای واکنشی به‌صورت دقیق‌تری استخراج شوند [۱۵].

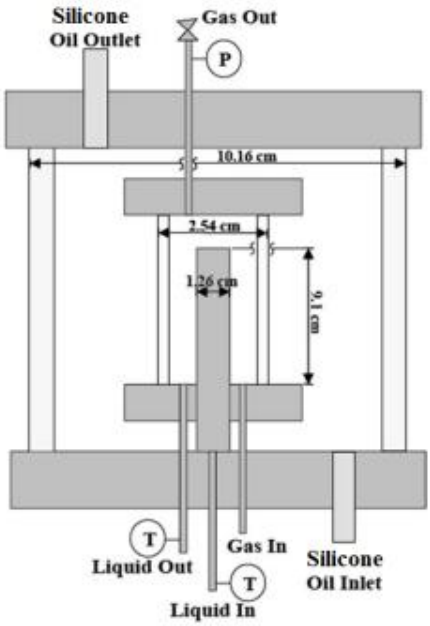
شماتیک ستون دیواره مرطوب در شکل ۲ نشان داده شده است. ارتفاع ستون توخالی فولاد ضد زنگ در مرکز ۹/۱ سانتی متر و قطر بیرونی آن ۱/۲۶ سانتی متر است. ستون در یک لوله شیشه‌ای با دیواره ضخیم محصور شده است که قطر داخلی (ID) و خارجی(OD) آن به ترتیب ۱/۸۳ سانتی متر و ۲/۵۴ سانتی متر است. شکاف بین سطح عمودی ستون و دیواره داخلی لوله شیشه‌ای باید به درستی طراحی شود زیرا قطر هیدرولیکی محفظه بر سرعت جریان گاز و همچنین مقاومت فیلم گاز در برابر

[1] Wet Wall Column

UNCORRECTED PROOF

انتقال جرم تأثیر می‌گذارد. اگر شکاف خیلی بزرگ باشد، مقاومت فیلم گاز به دلیل سرعت کم جریان گاز بسیار زیاد است، که اندازه‌گیری ضریب انتقال جرم مایع را دشوار می‌کند. از طرف دیگر، اگر شکاف خیلی کوچک باشد، فیلم مایع روی سطح توسط جریان سریع گاز مختل می‌شود. شار CO_2 را می‌توان با توجه به فشار کل و سرعت جریان و همچنین اختلاف غلظت CO_2 (کسر مولی) قبل و بعد از تماس با مایع طبق فرمول (۱) محاسبه کرد.

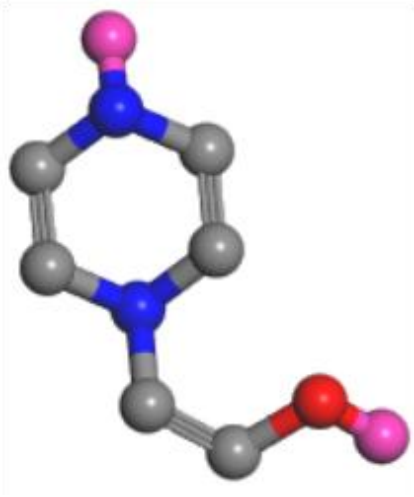
$$N_{CO_2} = \frac{1}{A} \times \frac{P_t * V_t}{RT} \times ([C_{CO_2}]in - [C_{CO_2}]out) \quad (۱)$$



شکل ۲. شماتیک ستون دیواره مرطوب مورد استفاده در آزمایش

داده‌های سرعت جذب و حلالیت CO_2 با استفاده از ستون دیوار مرطوب به دست آمد. در شکل ۳ می‌توان شماتیک ساختار مولکولی هیدروکسی اتیل پیپرازین را مشاهده نمود. همچنین ترکیب حلال‌ها قبل از افزودن CO_2 در جدول ۱ آمده است. لازم به ذکر است که در تمام گزارش m نشان دهنده مولال(مول آمین بر کیلوگرم آب) است. لازم به ذکر است در این مرحله با داشتن میزان انحلال کربن‌دی‌اکسید در حلال، به راحتی می‌توان میزان فشار جزئی کربن‌دی‌اکسید را در محلول مورد نظر محاسبه نمود.

UNCORRECTED PROOF



شکل ۳. ساختار حلال مورد استفاده در فرآیند (هیدروکسی اتیل پیپرازین)

جدول ۱. گونه‌های شیمیایی موجود در محلول

نام محلول	ترکیب محلول	وزن مولکولی (g/mol)	جرم(g)	درصد وزنی (٪)
۳ مولال هیدروکسی اتیل پیپرازین	هیدوکسی اتیل پیپرازین	۱۳۰/۱۹	۴۲۹/۶	۲۸/۱۰
	آب	۱۸/۰۲	۱۱۰۰	۷۱/۹۰
۵ مولال هیدروکسی اتیل پیپرازین	هیدوکسی اتیل پیپرازین	۱۳۰/۱۹	۶۵۱/۰	۳۹/۴۰
	آب	۱۸/۰۲	۱۰۰۰	۶۰/۶۰
۷/۷ مولال هیدروکسی اتیل پیپرازین	هیدوکسی اتیل پیپرازین	۱۳۰/۱۹	۷۵۱	۵۰
	آب	۱۸/۰۲	۷۵۰	۵۰

UNCORRECTED PROOF

به منظور مدل‌سازی حلالیت[1] کربن‌دی‌اکسید در محلول آبی پیپرازین، واکنش‌های تعادلی ذیل در فاز مایع در نظر گرفته می‌شوند: تشکیل و تفکیک[2]یون بیکربنات، واکنش‌های (۲) و (۳)، اتوپروتولیز[3] آب واکنش (۴)، پروتون‌دار (پروتونه) شدن و از دست دادن پروتون (دپروتونه شدن)[4] پیپرازین، واکنش‌های (۵) و (۶) و تشکیل یون‌های پیپرازین کربامات[5]، پیپرازین دی-کربامات[6] و پیپرازین کربامات پروتون‌دار شده[7]، به عبارتی واکنش‌های (۷) تا (۹) :

$$CO_2 + H_2O \overset{K_1}{\leftrightarrow} HCO_3^- + H^+ \quad (۲)$$

$$HCO_3^- \overset{K_2}{\leftrightarrow} CO_3^{2-} + H^+ \quad (۳)$$

$$H_2O \overset{K_3}{\leftrightarrow} H^+ + OH^- \quad (۴)$$

$$PZ + H^+ \overset{K_4}{\leftrightarrow} PZH^+ \quad (۵)$$

$$PZH^+ + H^+ \overset{K_5}{\leftrightarrow} PZH_2^{2+} \quad (۶)$$

$$PZ + HCO_3^- \overset{K_6}{\leftrightarrow} PZCOO^- + H_2O \quad (۷)$$

$$PZCOO^- + HCO_3^- \overset{K_7}{\leftrightarrow} PZ(COO^-)_2 + H_2O \quad (۸)$$

$$PZCOO^- + H^+ \overset{K_8}{\leftrightarrow} PZH^+COO^- \quad (۹)$$

۳- روش تحقیق

۳-۱- مدل‌سازی فرآیند با استفاده از روش سطح پاسخ

روش سطح پاسخ، به عنوان یک روش چند متغیره است که به نقاط داده کمتری با توانایی‌های قوی نیاز دارد تا بتواند عوامل متعدد مورد نظر را مدیریت کند و در عین حال اثرات تعاملی و خاص یک متغیر مستقل را آشکار کند. معادله درجه دوم چند جمله ای رایج ترین مدلی است که برای تطبیق داده‌های تجربی استفاده می‌شود [۱۶]. در این تحقیق از داده‌های تجربی مربوط به ستون دیواره مرطوب برای جذب کربن‌دی‌اکسید توسط هیدروکسی اتیل پیپرازین استفاده شده است. داده‌های وروی شامل غلظت آمین مورد استفاده (مولال)، میزان لودینگ ($\frac{mol}{mol\ alk}$)، فشار کل (psig)، دبی گاز (std l/min) و فشار CO_2 در ورودی بودند. پارامتر خروجی در این تحقیق فشار CO_2 در خروجی بود که توسط آن می‌توان میزان فلاکس انتقال جرم ($\frac{mol}{s\ cm2}$) را محاسبه نمود. پارامترهای ورودی و خروجی در شکل ۴ قابل مشاهده است.

UNCORRECTED PROOF

[1] Solubility

[2] Dissociation

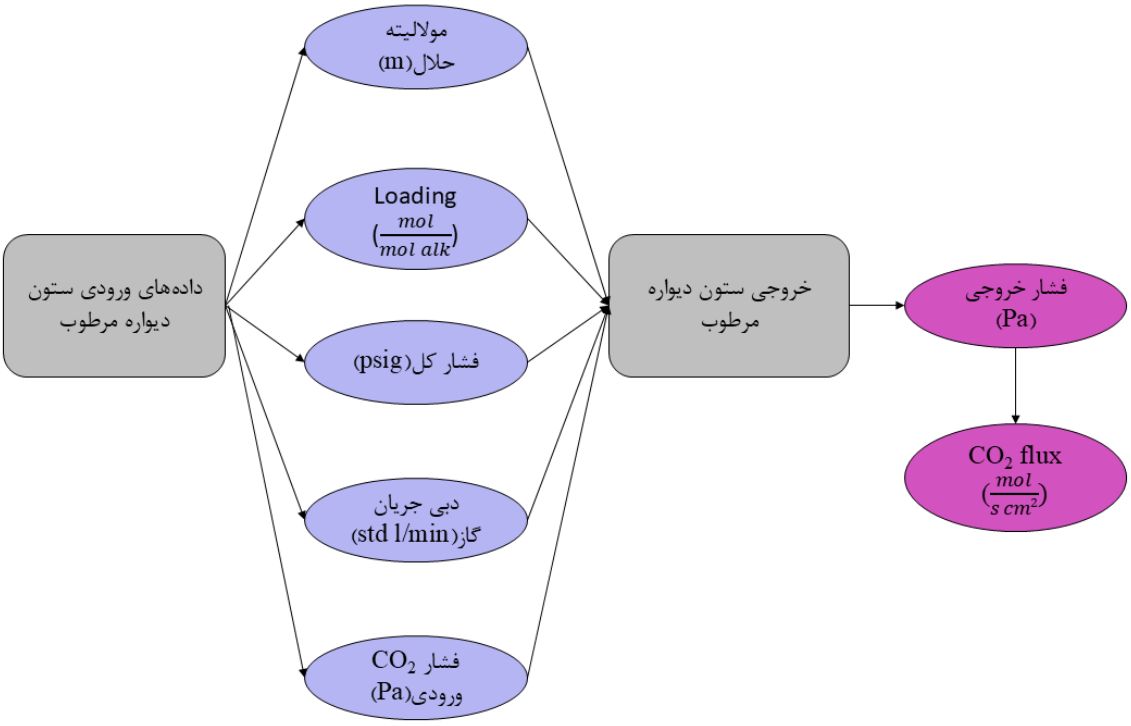
[3] Autoprotolysis

[4] Protonation and diprotonation

[5] Piperazine carbamate

[6] Piperazine dicarbamate

[7] Protonated piperazine carbamate



شکل ۴. پارامترهای ورودی و خروجی ستون دیواره مرطوب

در ابتدا برای پیش پردازش داده‌ها از روش سطح پاسخ استفاده شد و سپس با استفاده از درون‌یابی، مقادیر جدید و دقیق‌تری از خروجی‌ها را برای نقاط داده‌شده دیگر تخمین زده شد. پیش‌پردازش داده‌ها در شبکه‌های عصبی تأثیر مستقیمی بر دقت، سرعت همگرایی و توانایی مدل در تعمیم‌پذیری دارد [۱۷]. در جدول ۲ تمامی پارامترهای ورودی و خروجی برای ستون دیواره مرطوب و نیز محدوده آن‌ها نشان داده شده است:

جدول ۲. پارامترهای ورودی و خروجی ستون دیواره مرطوب

Parameters	Type	Unite	Symbols	Ranges
Molaity Of HEP	Input	$\frac{mol}{kg}$	A	3-7.7
CO_2 Loading	Input	$\frac{mol}{mol\ alk}$	B	0.07-0.25
Total Pressure	Input	psig	C	20-40
Gas Flow Rate	Input	Std l/min	D	3-5
P_{CO2} inlet	Input	Pa	E	6.5-16401
P_{CO2} outlet	Output	Pa	R_1	27.3-14968

UNCORRECTED

۳-۲- مدل‌سازی با استفاده از شبکه عصبی

شبکه‌های عصبی مصنوعی با الگو برداری از مغز انسان، دارای لایه‌ها و نورون‌های متعددی هستند که اطلاعات را پردازش و سپس انتقال می‌دهند [۱۸]. در این شبکه‌ها، داده‌ها از لایه ورودی دریافت شده و سپس بعد از پردازش در لایه‌ها و نورون‌های مختلف، داده‌های پردازش شده به لایه خروجی رسیده و نتایج نهایی را تولید می‌کنند. تعداد لایه‌ها و نورون‌ها برای به دست آوردن بهترین عملکرد شبکه، قابل اصلاح خواهند بود [۱۹]. می‌توان نتیجه گرفت که ANN یکی از بهترین تکنیک‌ها برای تجزیه و تحلیل داده‌هایی است که روابط غیرخطی و پیچیده ای دارند. در ANN هدف بدست آوردن وزن‌های مناسب (w) برای یک تابع خاص (f) است. هر ورودی (x_i) در وزن مربوط ضرب شده، همه کمیت‌ها با هم جمع می‌شوند و سپس مقدار آستانه یا بایاس (b) به مجموع کمیت‌ها اضافه می‌شود. معادله (۱۰) این رویکرد را برای داده‌های ورودی و خروجی نشان می‌دهد [۲۰]:

$$y = F\left(\sum_{i=1}^{N} \omega_i x_j + b\right) \qquad (۱۰)$$

۳-۲-۱- شبکه عصبی پرسپترون چندلایه

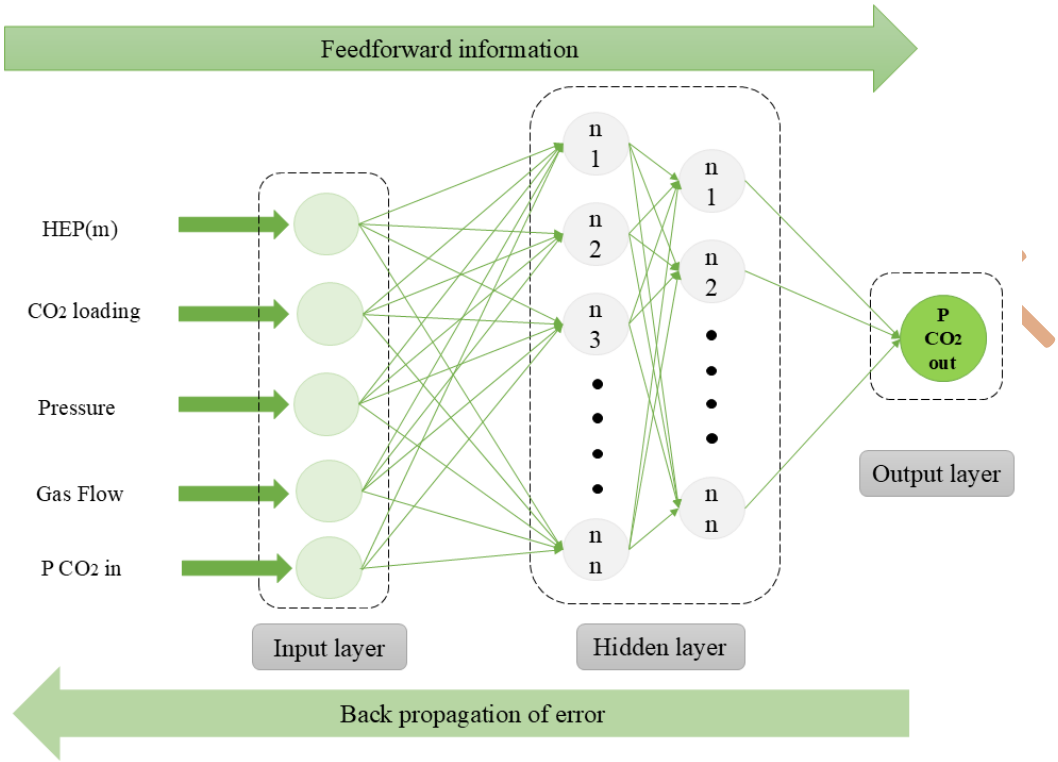
شبکه عصبی پرسپترون چندلایه از سه مجموعه لایه تشکیل شده است که شامل لایه ورودی، لایه‌های پنهان و لایه خروجی می‌باشد. یک شبکه عصبی مصنوعی از نورون‌هایی با سوگیری‌های مختص به خود، پیوندهای متقابل یا پیوندهای بین نورون‌ها و وزن‌هایی که به این اتصالات اختصاص یافته‌اند، تشکیل می‌شود. برای یادگیری شبکه، الگوریتم‌های آموزشی بر روی ورودی‌ها و مجموعه داده‌های هدف اعمال می‌گردند [۲۱]. در فرآیند آموزش MLP مقادیر وزن‌ها و بایاس‌ها به نحوی تنظیم می‌شود تا خطای کلی شبکه به به حداقل برسد [۲۲].

۳-۲-۲- شبکه عصبی پایه شعاعی

شبکه‌های عصبی با توابع پایه شعاعی از سه لایه تشکیل شده‌اند. لایه اول به داده‌های ورودی و لایه سوم به داده‌های خروجی مرتبط است، در حالی که لایه میانی به عنوان لایه پنهان عمل می‌کند. لایه پنهان شامل تعدادی نورون است که هریک دارای مرکز و شعاع مختص به خود برای اجرای عملکرد شعاعی می‌باشند. در نورون‌های خروجی، یک ترکیب خطی از توابع شعاعی تولید شده توسط نورون‌های لایه پنهان محاسبه می‌شود. فرآیند یادگیری در شبکه عصبی RBF معمولاً در دو مرحله انجام می‌گیرد، در ابتدا یادگیری مراکز و پهنای توابع شعاعی صورت گرفته و سپس به یادگیری وزن‌های بین نورون‌های لایه‌های پنهان و خروجی می‌پردازد. تعیین تعداد نورون‌های این شبکه به روش آزمون و خطا صورت می‌پذیرد. در ابتدا با تعداد نورون‌های زیاد شروع می‌شود و سپس به تدریج تعداد آنها کاهش می‌یابد، در حالی که بهینه‌سازی خطا نیز به صورت همزمان مورد توجه قرار

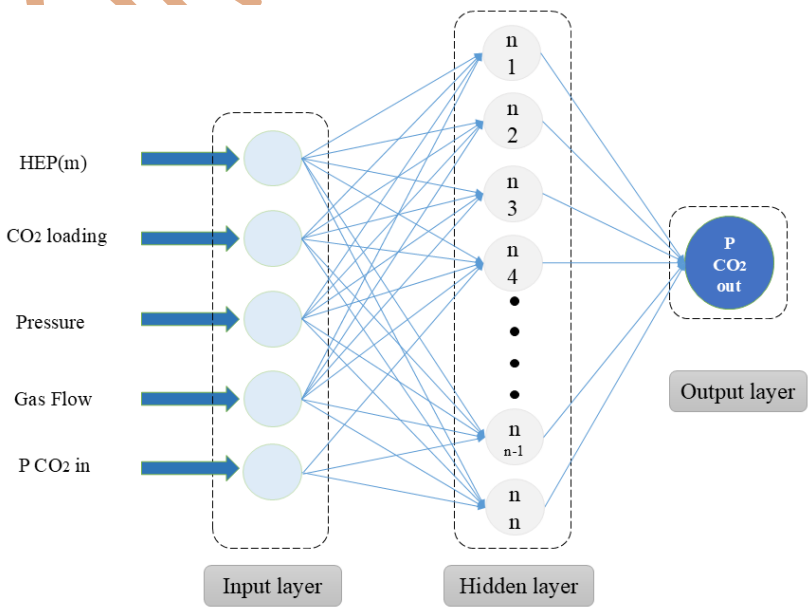
UNCORRECTED PROOF

می‌گیرد [۲۳]. برای مدل‌سازی با استفاده از شبکه عصبی از دو شبکه MLP و RBF استفاده شد که معماری دو شبکه در شکل‌های ۵ و ۶ آورده شده است.



شکل ۵. ساختار شبکه MLP

برای هر دو شبکه ۵ ورودی و یک خروجی در نظر گرفته شده است که در این شبکه‌ها، تفاوت در ساختار شبکه و تعداد لایه‌ها و نحوه آموزش شبکه است که در ادامه به نتایج آن‌ها می‌پردازیم.



شکل ۶. ساختار شبکه تک لایه RBF

برای مشخص‌کردن بهترین نتایج محاسبه دو پارامتر که در ادامه توضیح داده می‌شود ضروری است، MSE میانگین مربعات خطا، به عنوان یک تابع ضرر در نظر گرفته شود که باید کاهش یابد و اغلب در برنامه‌های یادگیری ماشین در دنیای واقعی استفاده می‌شود.

$$MSE = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(Y_{predicted} - Y_{real})^2 \quad (۱۱)$$

ضریب تعیین برازش (R^2) مدل را با نتایج علمی‌ارزیابی می‌کند. هر چه R^2 به ۱ نزدیک‌تر باشد، پیش‌بینی‌های داده‌های تجربی بالاتر است. R^2 در معادله () محاسبه می‌شود:

$$R^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\frac{(Y_{predicted} - Y_{real})^2}{(Y_{predicted} - Y_{mean})^2} \quad (۱۲)$$

UNCORRECTED PROOF

۴- نتایج و بحث

۴-۱- نتایج حاصل از RSM

بعد از ارزیابی مدل Quadratic درجه ۲ و به دست آوردن ارتباط داده‌ها با خروجی، شکل ۸ نشان دهنده نحوه‌ی رفتار ورودی‌ها به خروجی است به طوری‌که شیب مثبت نشان دهنده ارتباط مستقیم ورودی و خروجی و شیب منفی نشان دهنده رفتار معکوس آنها است. هرچه شیب تندتر باشد پارامتر ورودی بر روی خروجی تاثیر بیشتری دارد. برای مثال میزان فشار ورودی تاثیر بسیار زیادی بر خروجی دارد.با اعمال دیتاهای واقعی در معادله (۱۳) میزان فشار خروجی در ستون دیواره قابل محاسبه خواهد بود.

$$P_{CO2}\ \text{out} = +2860.56841-6.40763*A+1589.78250*B+4.37258*C-607.58005*D+0.814222*E \quad (۱۳)$$

در این روش، ابتدا یک مدل ریاضی بر اساس داده‌های تجربی ایجاد می‌شود. این مدل معمولاً به صورت یک مدل رگرسیونی است که رابطه بین ورودی‌ها و خروجی‌ها را بیان می‌کند. سپس، تجزیه و تحلیل واریانس (ANOVA) برای بررسی کیفیت مدل و ارزیابی اهمیت هر یک از متغیرها و تعاملات آن‌ها انجام می‌شود.

نتایج ANOVA نشان می‌دهد که مقدار F-value برابر با ۱۵۶۳۸/۸۶ است که این نشان دهنده معنی‌دار بودن مدل است. از طرفی پارامترهایی از مدل که مقدار P-value کمتر از ۰/۰۵ را دارند، پارامترهایی هستند که تاثیر زیادی بر روی فرآیند دارند. در اینجا پارامترهای مهم عبارتند از A، E، AB، AC، AE، BC، A^2. تجزیه و تحلیل ضریب همبستگی پیرسون[10] (PCC) برای استخراج روابط وابسته برفشار جزئی کربن‌دی‌اکسید بر روی متغیرهای مستقل به کار گرفته شد [۲۴]. همبستگی پیرسون که در شکل ۷ ارائه شده است. رنگ‌های آبی تاثیر مثبت و رنگ‌های قرمز تاثیر معکوس پارامترها را با هم نشان می‌دهد.

[10] Pearson correlation coefficient

UNCORRECTED PROOF

	Run	A: HEP	B: CO_2 Loading	C:P	D: Gas dry	E: PCO_2 in	PCO_2 out
Run	1	0.939	0.32	0.464	-0.25	0.242	0.255
A: HEP	0.939	1	0	0.216	0	-0.011	-0.01
B: CO_2 Loading	0.32	0	1	0.833	-0.717	0.655	0.701
C:P	0.464	0.216	0.833	1	-0.488	0.486	0.52
D: Gas dry	-0.25	0	-0.717	-0.488	1	-0.79	-0.844
E: PCO_2 in	0.242	-0.011	0.655	0.486	-0.79	1	0.995
PCO_2 out	0.255	-0.01	0.701	0.52	-0.844	0.995	1

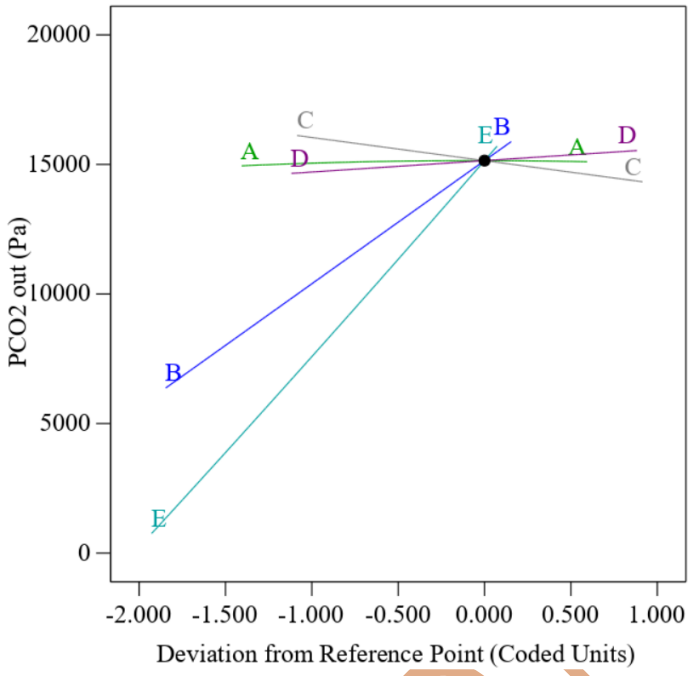
شکل ۷. ماتریس همبستگی پیرسون برای جذب CO_2 بر اساس داده‌ها

جدول ۳. نتایج حاصل از مدل‌سازی با استفاده از طراحی آزمایش

Std. Dev.	66.99	R^2	0.9998
Mean	2573.93	Adjusted R^2	0.9997
C.V. %	2.60	Predicted R^2	0.9996
		Adeq Precision	476.2042

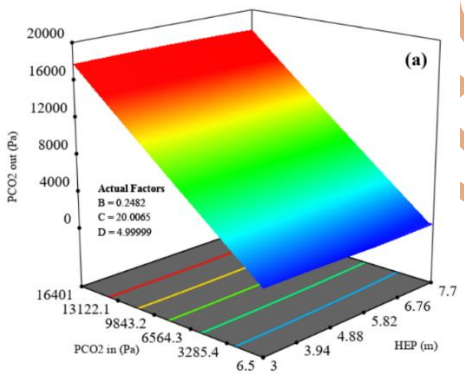
مقدار R^2 پیش‌بینی شده (۰/۹۹۹۶) با مقدار R^2 تعدیل شده (۰/۹۹۹۷) تطابق منطقی دارد، زیرا اختلاف آنها کمتر از ۰/۲ است. این نشان می‌دهد که مدل از دقت بالایی برخوردار است. علاوه بر این، مقدار Adeq Precision که نسبت سیگنال به نویز را اندازه‌گیری می‌کند، برابر با ۴۷۶/۲۰۴ است که بسیار بالاتر از مقدار مطلوب ۴ می‌باشد. این مقدار نشان‌دهنده وجود سیگنال کافی است که تأیید می‌کند مدل به خوبی قادر به پیمایش فضای طراحی است.

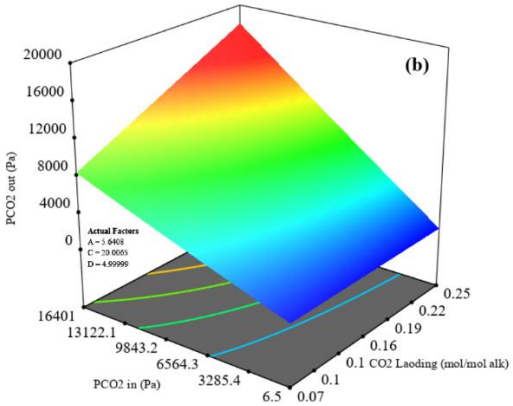
UNCORRECTED PROOF

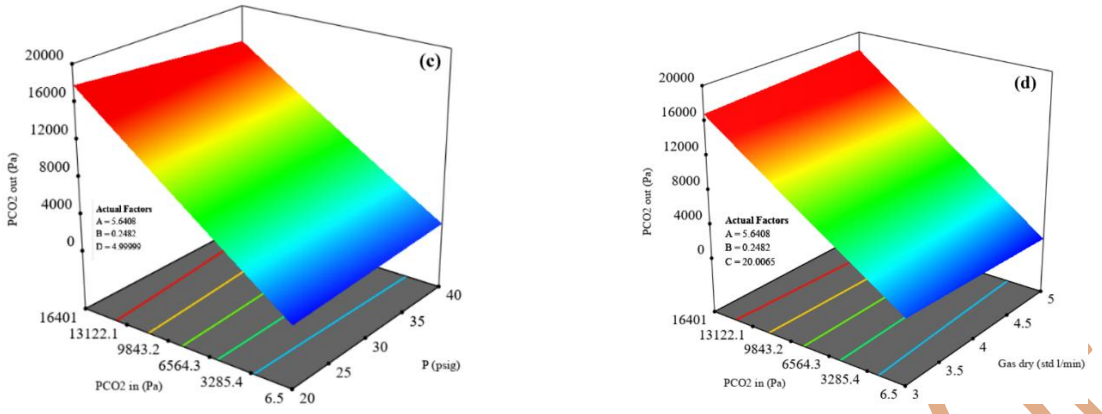


شکل ۸. انحراف از نقطه مرجع

نتایج نمودارهای سه بعدی، نشان دهنده روند تاثیر همزمان دوپارامتر بر خروجی است که در شکل ۹ نشان داده شده است:







شکل ۹. (الف) تاثیر HEP و PCO_2 in بر فشار خروجی(PCO_2 out) CO_2، (ب) تاثیر CO_2 لودینگ و PCO_2 in بر فشار خروجی CO_2 (PCO_2 out)، (ج) تاثیر P و PCO_2 in بر فشار خروجی(PCO_2 out) CO_2 و (د) اثر Gas dry و PCO_2 in بر فشار خروجی CO_2 (PCO_2 out).

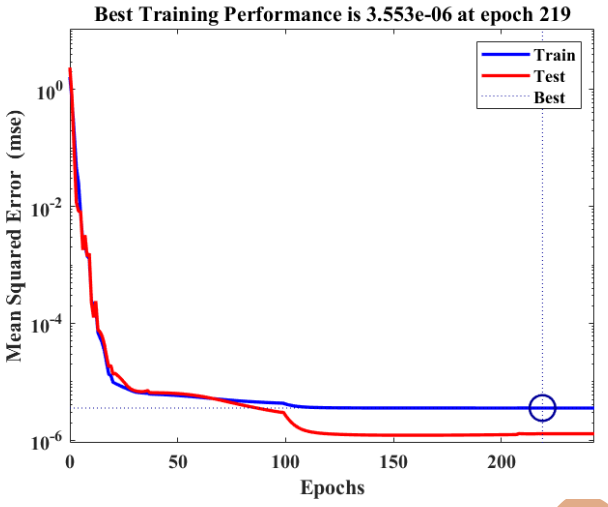
نمودارهای شکل ۹ به خوبی نشان می‌دهند که پارامترهای مختلف از جمله غلظت حلال، بارگذاری CO_2، فشار عملیاتی و دبی جریان گاز خشک می‌توانند به طور مستقیم بر فشار خروجی CO_2 از ستون دیواره مرطوب تاثیر بگذارند.

۴-۲- نتایج حاصل از شبکه MLP

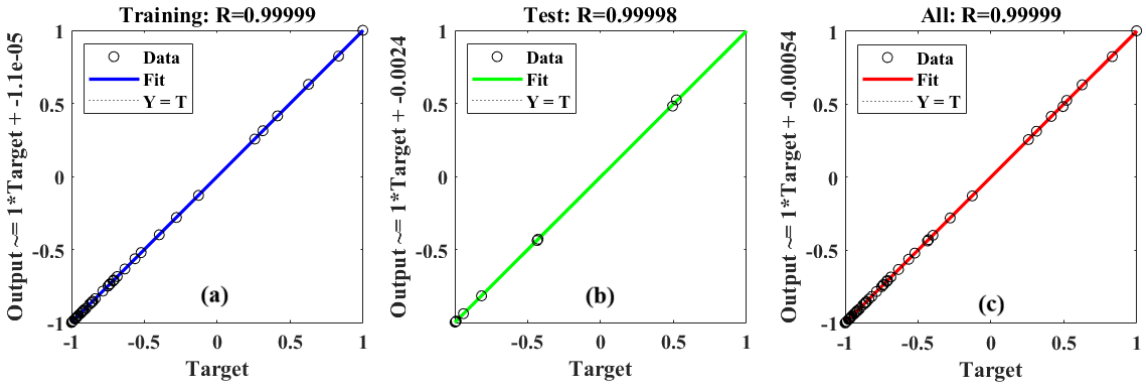
برای انتخاب تعداد لایه‌ها و نورون‌ها در هر الگوریتم یادگیری، ساختارهای مختلف شبکه عصبی با تعداد نورون‌هایی در محدوده ۵ تا ۲۰ برای هر لایه به‌دقت مورد بررسی و ارزیابی قرار گرفتند. نتایج حاصل از اجرای این شبکه‌ها برای الگوریتم‌های یادگیری LM، BR و SCG به ترتیب در جدول ۴ برای بهترین عملکرد هر الگوریتم ارائه شده است. برای انتخاب بهترین ساختار شبکه برای هر الگوریتم، معیار MSE و بیشینه R^2 به‌عنوان معیار اصلی در نظر گرفته شده است. همچنین در این جدول تعداد ۵۰ داده که از اول از سایر داده‌ها جدا شده بود، به عنوان داده‌ی تست به شبکه داده شد تا صحت و اعتبار شبکه بررسی شود.

بهترین نتیجه برای شبکه MLP دولایه پنهان با تابع یادگیری Trainbr به دست آمد. نتایج برای تابع آموزش Trainbr بهتر از Trainlm و Trainscg بود به طوری که هم مقدار R^2 بالاتر بود و هم MSE پایین‌تری داشت. تعداد دوره‌های آموزشی Trainlm و Trainscg بسیار کمتر از Trainbr بود. شکل‌های ۱۰تا ۱۲ نتایج و خروجی‌های متلب برای شبکه MLP با دولایه پنهان در لایه اول ۳ نورون و در لایه دوم ۷ نورون برای تابع آموزش Trainbr را نشان می‌دهد.

UNCORRECTED PROOF



شکل ۱۰. نمودار عملکرد شبکه MLP

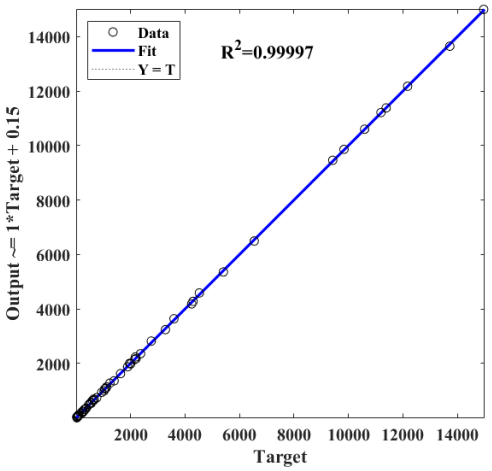


شکل ۱۱. نمودار رگرسیون کلی شبکه MLP از سمت چپ: (الف) داده‌های آموزش فشار خروجی شبکه MLP (ب) داده‌های تست فشار خروجی شبکه MLP (ج) کل داده‌های فشار خروجی شبکه MLP

۴-۳- نتایج حاصل از شبکه RBF

برای بررسی شبکه RBF و مقایسه آن با شبکه MLP پارامترهای شبکه باید بهینه شوند. بعد از اجرا کردن شبکه مشخص شد که MSE شبکه RBF با تعداد ۱۵ نورون تقریبا با MLP برابر است و لذا به عنوان شبکه بهینه در نظر گرفته شد. شکل ۱۲ رگرسیون حاصل از شبکه عصبی RBF نشان می‌دهد.

UNCORRECTED PROOF



شکل ۱۲. نمودار رگرسیون شبکه RBF برای فشار خروجی ستون دیواره مرطوب

۴-۴- مقایسه مدل‌ها

نتایج نشان میدهد که شبکه MLP با ۱۰ نورون در دولایه به نتیجه مطلوب می‌رسد و شبکه RBF با ۱۵ نورون به عملکرد مطلوب خواهد رسید. این نکته مناسب بودن هر دو شبکه توسعه داده شده را نشان می‌دهد. در جدول ۴ مقایسه‌ای از دو شبکه MLP وRBF ارائه شده است که نتایج نشان می‌دهد هر دو شبکه عملکرد بسیار مطلوبی دارند.

جدول ۴. مقایسه شبکه MLP و RBF

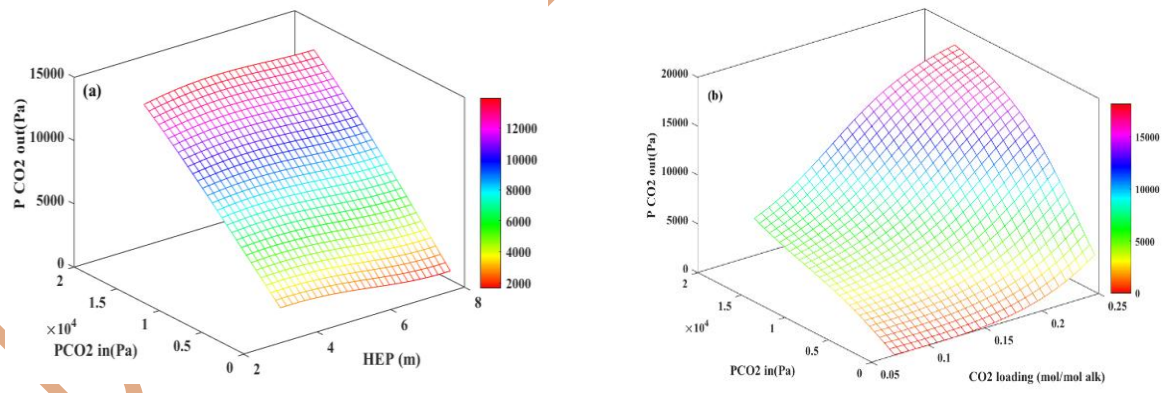
Neural Network	Neurons	R^2	MSE	
			Net_MSE	Test_MSE
MLP	[3 7]	0.99999	3.2244e-06	2.5466e-05
RBF	15	0.99997	1.48E-05	2.13E-05

۴-۵- نمودارهای سه بعدی

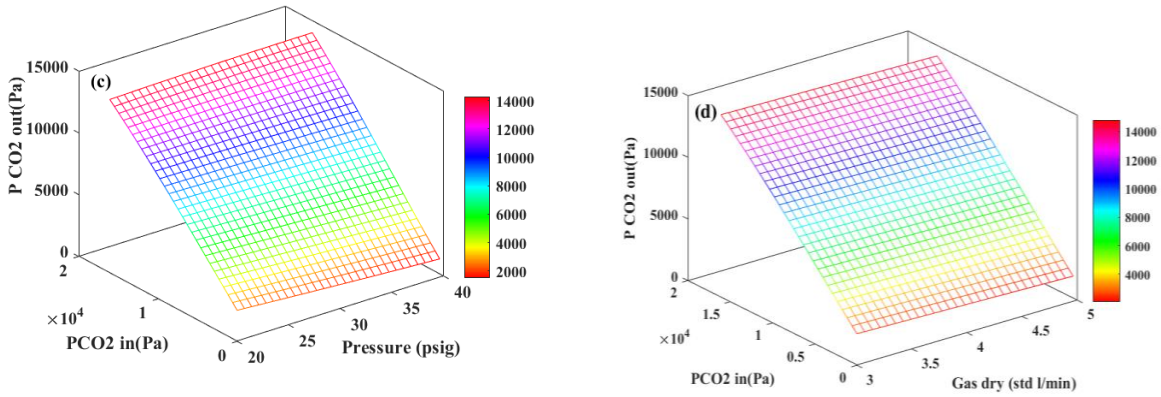
نمودارهای سه بعدی اثر همزمان پارامترها برای هر دو شبکه عصبی، در ادامه آورده شده است که نمودارهای سه‌بعدی ارائه‌شده به‌خوبی تأثیر همزمان پارامترهای مختلف بر فشار خروجی CO_2 (PCO_2 out) را در ستون دیواره مرطوب نشان می‌دهند. این نمودارها شامل اثرات متقابل فشار ورودی CO_2 (PCO_2 in) با پارامترهای دیگر شامل هیدروکسی‌اتیل‌پیپرازین (HEP)، بارگذاری CO_2، فشار عملیاتی، دبی گاز خشک و ترکیب این پارامترها در هر دو شبکه عصبی MLP و RBF است. شکل ۱۳(الف) نشان

UNCORRECTED PROOF

می‌دهد که با افزایش غلظت HEP، فشار خروجی CO_2 کاهش می‌یابد. همچنین، افزایش فشار ورودی CO_2 نیز به طور مستقیم فشار خروجی را افزایش می‌دهد. این رفتار نشان‌دهنده تأثیر غالب فشار ورودی بر فشار خروجی است، در حالی که افزایش HEP موجب کاهش فشار نهایی می‌شود. در شکل ۱۳ (ب)، افزایش بارگذاری CO_2 موجب افزایش فشار خروجی می‌شود. این امر به این دلیل است که بارگذاری بیشتر، نشان‌دهنده ظرفیت بیشتر جاذب برای جذب CO_2 است. همچنین، فشار ورودی CO_2 نیز اثر افزایشی بر فشار خروجی دارد. شکل ۱۳ (ج) نشان می‌دهد که افزایش فشار عملیاتی باعث افزایش فشار خروجی CO_2 می‌شود. این نتیجه نشان‌دهنده این است که فشار بالاتر به ارتقای فرآیند جذب کمک می‌کند. همچنین، فشار ورودی CO_2 همچنان به طور مستقیم بر افزایش فشار خروجی تأثیر دارد. در شکل ۱۳ (د)، افزایش دبی گاز خشک نیز باعث افزایش فشار خروجی CO_2 می‌شود. این به این دلیل است که دبی بالاتر جریان گاز، زمان تماس بیشتر با سطح جاذب را فراهم می‌کند. در این حالت، فشار ورودی CO_2 همچنان به صورت مستقیم بر فشار خروجی تأثیرگذار است. تطابق نتایج دو شبکه عصبی نشان‌دهنده قابلیت اعتماد مدل‌ها در پیش‌بینی تأثیر پارامترها است. نمودارهای سه‌بعدی ارائه‌شده نشان می‌دهند که افزایش فشار ورودی CO_2 در تمامی موارد به افزایش فشار خروجی منجر می‌شود. همچنین، پارامترهای HEP، بارگذاری CO_2، فشار عملیاتی و دبی گاز خشک هر یک به‌صورت مجزا نیز بر فشار خروجی تأثیر دارند. نتایج به‌دست‌آمده از هر دو شبکه عصبی MLP و RBF هماهنگی خوبی با یکدیگر دارند که نشان می‌دهد این مدل‌ها می‌توانند به‌صورت مؤثر برای پیش‌بینی فشار خروجی در شرایط مختلف استفاده شوند. این هماهنگی به‌ویژه در مدل‌سازی جذب CO_2 توسط ستون دیواره مرطوب بسیار ارزشمند است.



CORRECTED PROOF



شکل ۱۳. (الف) تاثیر HEP و PCO_2 in بر فشار خروجی(PCO_2 out) CO_2 ، تاثیر CO_2 لودینگ و PCO_2 in بر فشار خروجی CO_2 (PCO_2 out)، تاثیر P و PCO_2 in بر فشار خروجی(PCO_2 out) CO_2 و اثر Gas dry و PCO_2 in بر فشار خروجی(PCO_2 out) CO_2.

UNCORRECTED PROOF

۵- نتیجه گیری و آینده نگری

در این پژوهش، روش سطح پاسخ و شبکه‌های عصبی MLP و RBF برای پیش‌بینی فشار خروجی ستون دیواره مرطوب مورد استفاده قرار گرفتند. پس از اجرای مدل‌ها و بهینه‌سازی شبکه‌ها، مشخص شد که شبکه MLP با تابع آموزش Trainbr و ۲۱۹ دوره، با خطای ۰/۰۰۰۰۰۳۲۴۴عملکرد بهتری نسبت به شبکه RBF دارد و از تعداد نورون کمتری استفاده می‌کند. همچنین، شبکه RBF با ۱۵ نورون و خطای ۰/۰۰۰۰۱۴۸ نیز دقت قابل قبولی نشان داد. نتایج نشان دادند که فشار خروجی با افزایش درصد بارگذاری حلال و فشار ورودی کربن‌دی‌اکسید افزایش یافته و این دو پارامتر بیشترین تأثیر را بر فشار خروجی دارند. علاوه بر این، با افزایش لودینگ، ضریب کلی انتقال جرم افزایش یافته اما فلاکس مولی CO_2 کاهش می‌یابد. نمودارهای به‌دست‌آمده از طریق شبکه‌های عصبی در مقایسه با نمودارهای نرم‌افزار طراحی آزمایش، جزئیات بیشتری را ارائه داده و نشان‌دهنده دقت بالاتر مدل‌های شبکه عصبی در تحلیل داده‌ها هستند.

کارهای آتی در این زمینه برای ارزیابی بهتر جذب کربن دی اکسید، می تواند شامل توسعه دیتا در دامنه‌های گسترده تر برای دما، فشار، بررسی سایر مشتقات پیپرازین به عنوان یک حلال موثر باشد. همچنین اعتبارسنجی را می‌توان در مقیاس پایلوت یا ستون پر شده ارزیابی کرد. باید توجه داشت که مدل‌های داده‌محور (RSM/ANN) به دامنه داده‌های آزمایش محدود هستند، در برون‌یابی ریسک دارند و در صورت کوچک بودن مجموعه‌داده یا نحوه جداسازی نامناسب، احتمال بیش‌برازش وجود دارد؛ لذا برای تعمیم صنعتی، باید از داده‌های بیشتری استفاده نمود. همچنین برای نتایج دقیق تر شبکه های عصبی می توان از روش‌های اعتبارسنجی آماری دقیق‌تر نظری مونت کارلو به همراه k-fold cross validation نیز استفاده نمود.

- **این اثر تحت حمایت مادی بنیاد علم ایران (INSF) و ستاد ویژه توسعه فناوری نانو برگرفته شده از طرح شماره ۴۰۴۱۳۸۹ انجام شده است.**

۶- مراجع

۱. Yuan, Y., *Mass Transfer Rate in Semi-Aqueous Amines for Co₂ Capture*. 2018, The University of Texas at Austin.

۲. Rahimi, A., F. Bahmanzadegan, and A. Ghaemi, *Analysis of CO2 solubility in ionic liquids as promising absorbents using response surface methodology and machine learning*. Journal of CO2 Utilization, 2025. **93**: p. 103043.

۳. Bahmanzadegan, F., M.A. Pordsari, and A. Ghaemi, *Improving the efficiency of 4A-zeolite synthesized from kaolin by amine functionalization for CO2 capture*. Scientific Reports, 2023. **13**(1): p. 12533.

UNCORRECTED PROOF

٤. Rastegar, Z. and A. Ghaemi, *CO2 absorption into potassium hydroxide aqueous solution: experimental and modeling.* Heat and Mass Transfer, 2022. **58**(3): p. 365-381.

٥. Zhang, X., C.-F. Zhang, S.-J. Qin, and Z.-S. Zheng, *A Kinetics Study on the Absorption of Carbon Dioxide into a Mixed Aqueous Solution of Methyldiethanolamine and Piperazine.* Industrial & Engineering Chemistry Research, 2001. **40**(17): p. 3785-3791.

٦. Rambe, H., et al. *CO2 absorption using aqueous potassium carbonate (K2CO3) promoted by piperazine (PZ) in packed column reactor*. in *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*. 2024. IOP Publishing.

٧. Yuan, Y. and G.T. Rochelle, *CO2 absorption rate and capacity of semi-aqueous piperazine for CO2 capture.* International Journal of Greenhouse Gas Control, 2019. **85**: p. 182-186.

٨. Norouzbahari, S., S. Shahhosseini, and A. Ghaemi, *Modeling of CO2 loading in aqueous solutions of piperazine: Application of an enhanced artificial neural network algorithm.* Journal of Natural Gas Science and Engineering, 2015. **24**.

٩. Golzar, K., H. Modarress, and S. Amjad-Iranagh, *Evaluation of density, viscosity, surface tension and CO2 solubility for single, binary and ternary aqueous solutions of MDEA, PZ and 12 common ILs by using artificial neural network (ANN) technique.* International Journal of Greenhouse Gas Control, 2016. **53**: p. 187-197.

١٠. Baghban, A., A.H. Mohammadi, and M.S. Taleghani, *Rigorous modeling of CO2 equilibrium absorption in ionic liquids.* International Journal of Greenhouse Gas Control, 2017. **58**: p. 19-41.

١١. Tang, X., et al., *New insights into the functional group influence on CO2 absorption heat and CO2 equilibrium solubility by piperazine derivatives.* Chemical Engineering Journal, 2024. **500**: p. 157528.

١٢. Wahyudi, A. and U. Suriyapraphadilok, *Predicting CO2 equilibrium solubility in various amine-CO2 systems using an artificial neural network model.* Energy and AI, 2024. **18**: p. 100426.

١٣. Masoumi, H., A. Imani, A. Aslani, and A. Ghaemi, *Modeling of carbon dioxide absorption into aqueous alkanolamines using machine learning and response surface methodology.* Scientific Reports, 2024. **14**(1): p. 23967.

١٤. Shokri, A. and A. Ghaemi, *Developing artificial neural networks and response surface methodology for evaluating CO2 absorption into K2CO3/piperazine solution.* Case Studies in Chemical and Environmental Engineering, 2024. **9**: p. 100725.

١٥. Pashaei, H., A. Ghaemi, M. Nasiri, and B. Karami, *Experimental modeling and optimization of CO2 absorption into piperazine solutions using RSM-CCD methodology*. ACS omega, 2020. **5**(15): p. 8432-8448.

١٦. Ji, Y., et al., *Cost-effective carbon-based amine adsorbents for carbon capture: Equilibrium, kinetics and selectivity.* Journal of CO2 Utilization, 2023. **69**: p. 102422.

١٧. Dziejarski, B., J. Serafin, K. Andersson, and R. Krzyżyńska, *CO2 capture materials: a review of current trends and future challenges.* Materials Today Sustainability, 2023: p. 100483.

١٨. Aniruddha, R., I. Sreedhar, and B.M. Reddy, *MOFs in carbon capture-past, present and future.* Journal of CO2 Utilization, 2020. **42**: p. 101297.

١٩. Soori, M., B. Arezoo, and R. Dastres, *Artificial intelligence, machine learning and deep learning in advanced robotics, a review.* Cognitive Robotics, 2023. **3**: p. 54-70.

UNCORRECTED PROOF

.٢٠ Pires, P.B., J.D. Santos, and I.V. Pereira, *Artificial neural networks: history and state of the art.* Encyclopedia of Information Science and Technology, Sixth Edition, 2025: p. 1-25.

.٢١ Sharifani, K. and M. Amini, *Machine learning and deep learning: A review of methods and applications.* World Information Technology and Engineering Journal, 2023. **10**(07): p. 3897-3904.

.٢٢ Yang, Z., *FMFO: Floating flame moth-flame optimization algorithm for training multi-layer perceptron classifier.* Applied Intelligence, 2 :(١)٥٣ .٠٢٣p. 251-271.

.٢٣ Park, Y.-S. and S. Lek, *Artificial neural networks: Multilayer perceptron for ecological modeling*, in *Developments in environmental modelling*. 2016, Elsevier. p. 123-140.

.٢٤ Plaza, M., et al., *Development of low-cost biomass-based adsorbents for postcombustion CO2 capture.* Fuel, 2009. **88**(12): p. 2442-2447.

UNCORRECTED PROOF